

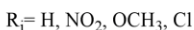
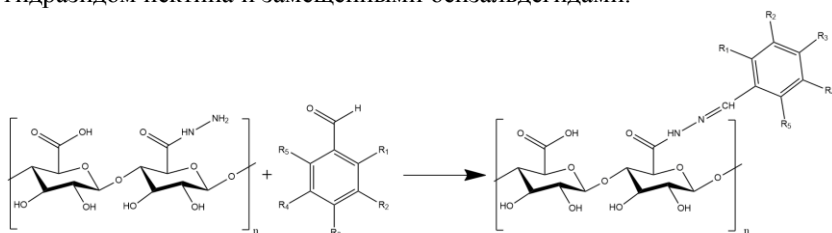
## ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРАЗОНОВ ПЕКТИНА И ИХ ДИНАМИЧЕСКИХ СМЕСЕЙ

Толстых Д.А., Кожихова К.В., Миронов М.А.

Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Метод динамической комбинаторной химии предоставляет возможность проведения массового скрининга веществ в обратимых системах с большим количеством реагентов [1]. Данный метод позволяет получать библиотеки соединений на основе сродства к рецепторам как неорганической, так и органической природы [2]. Динамические смеси гидразонов пектина являются системами, которые могут быть потенциально применены в поиске носителей, ориентированных на точечную доставку лекарственных веществ.

В ходе проведенной работы был синтезирован ряд гидразонов низкоэтерифицированного пектина (степень этерификации 35%). Реакции проводились по механизму образования оснований Шиффа между гидразидом пектина и замещенными бензальдегидами.



Также было исследовано поведение динамической системы гелей гидразонов, полученных в результате реакций с тремя замещенными бензальдегидами: 3-нитробензальдегидом, 4-хлорбензальдегидом и 3,4,5-триметоксибензальдегидом. Структуры полученных продуктов были подтверждены методом спектроскопии протонного магнитного резонанса.

В данной системе без использования сторонних рецепторов равновесие сместилось в сторону образования продукта взаимодействия гидразида пектина с 3,4,5-триметоксибензальдегидом. Введение ионов  $\text{Cu}^{2+}$  не оказало существенного влияния на равновесие в системе.

1. Huc I., Nguyen R. Dinamic Combinatorial Chemistry // Combinatorial Chemistry & High Throughput Screening. 2001. V. 4, No. 1. P. 53–74.

2. Belowich M.E., Stoddart J.F. Dinamic imine chemistry // Chem. Soc. Rev. 2012. V. 41. P. 2003–2024.

*Авторы работы благодарят Министерство образования и науки РФ за финансовую поддержку (проектное финансирование заявка № 1626).*

## **СОЛЬВАТАЦИЯ АКТИВНОГО ЦЕНТРА ПОЛИКОНДЕНСАЦИИ 3-ХЛОР-3-ФЕНИЛФТАЛИЛИДЕНА НИТРОБЕНЗОЛОМ**

*Мацевич О.В., Янборисов В.М., Самигуллина З.С.*

Уфимский государственный университет экономики и сервиса  
450078, г. Уфа, ул. Чернышевского, д. 145

Активным центром реакции поликонденсации псевдохлорангидридов ароматических *o*-кетокарбоновых кислот, протекающей по механизму электрофильного замещения, является ионная пара, которая образуется при взаимодействии мономера и катализатора – кислоты Льюиса [1]. В настоящей работе в рамках теории супермолекулы проведено квантово-химическое исследование сольватации активных центров, состоящих из молекул 3-хлор-3-фенилфталилдена (ХФФ), простейшего представителя класса исследуемых мономеров, и кислот Льюиса -  $\text{AlCl}_3$ ,  $\text{InCl}_3$ ,  $\text{GaCl}_3$ ,  $\text{SbCl}_5$  нитробензолом – растворителем, применяемым для синтеза полиариленфталидов.

В результате сольватации активного центра образуется множество межмолекулярных комплексов с одной, двумя и тремя (рис.) молекулами растворителя. Обнаружить термодинамически устойчивые комплексы, в состав которых входит четыре и более молекулы растворителя, расположенные в непосредственной близости от активного центра, не удалось. По-видимому, это связано со стерическими затруднениями, возникающими из-за относительно большого размера молекул нитробензола, соизмеримого с размером ХФФ. Следует отметить, что ни в одном из смоделированных сольватных комплексов не происходит разделение ионной пары или заметное (существенное) изменение структуры активного центра поликонденсации.